

```

39      ! Number of general parameters
50.0000 !Overcoordination parameter
9.5469 !Overcoordination parameter
26.5405 !Valency angle conjugation parameter
1.7224 !Triple bond stabilisation parameter
6.8702 !Triple bond stabilisation parameter
60.4850 !C2-correction
1.0588 !Undercoordination parameter
4.6000 !Triple bond stabilisation parameter
12.1176 !Undercoordination parameter
13.3056 !Undercoordination parameter
-70.5044 !Triple bond stabilization energy
0.0000 !Lower Taper-radius
10.0000 !Upper Taper-radius
2.8793 !Not used
33.8667 !Valency undercoordination
6.0891 !Valency angle/lone pair parameter
1.0563 !Valency angle
2.0384 !Valency angle parameter
6.1431 !Not used
6.9290 !Double bond/angle parameter
0.3989 !Double bond/angle parameter: overcoord
3.9954 !Double bond/angle parameter: overcoord
-2.4837 !Not used
5.7796 !Torsion/B0 parameter
10.0000 !Torsion overcoordination
1.9487 !Torsion overcoordination
-1.2327 !Conjugation 0 (not used)
2.1645 !Conjugation
1.5591 !vdWals shielding
0.1000 !Cutoff for bond order (*100)
2.1365 !Valency angle conjugation parameter
0.6991 !Overcoordination parameter
50.0000 !Overcoordination parameter
1.8512 !Valency/lone pair parameter
0.5000 !Not used
20.0000 !Not used
5.0000 !Molecular energy (not used)
0.0000 !Molecular energy (not used)
2.6962 !Valency angle conjugation parameter
8      ! Nr of atoms; cov.r; valency;a.m;Rvdw;Evdw;gammaEEM;cov.r2;#
      alfa;gammaavlW;valency;Eunder;Eover;chiEEM;etaEEM;n.u.
      cov r3;Elp;Heat inc.;n.u.;n.u.;n.u.;n.u.
      ov/un;val1;n.u.;val3,vval4
C      1.3817  4.0000 12.0000 1.8903  0.1838  0.9000  1.1341  4.0000
      9.7559  2.1346  4.0000 34.9350 79.5548  5.9666  7.0000  0.0000
      1.2114  0.0000 202.5551  8.9539 34.9289 13.5366  0.8563  0.0000
      -2.8983  2.5000  1.0564  4.0000  2.9663  0.0000  0.0000  0.0000
H      0.8930  1.0000  1.0080  1.3550  0.0930  0.8203 -0.1000  1.0000
      8.2230 33.2894  1.0000  0.0000 121.1250  3.7248  9.6093  1.0000
      -0.1000  0.0000 61.6606  3.0408  2.4197  0.0003  1.0698  0.0000
      -19.4571 4.2733  1.0338  1.0000  2.8793  0.0000  0.0000  0.0000
O      1.2450  2.0000 15.9990  2.3890  0.1000  1.0898  1.0548  6.0000
      9.7300 13.8449  4.0000 37.5000 116.0768  8.5000  8.3122  2.0000
      0.9049  0.4056 59.0626  3.5027  0.7640  0.0021  0.9745  0.0000
      -3.5500  2.9000  1.0493  4.0000  2.9225  0.0000  0.0000  0.0000
Ca     1.9535  2.0000 40.0870  2.7142  0.1886  1.0000  1.0000  2.0000

```

	10.5235	27.5993	3.0000	38.0000	0.0000	-1.7130	6.5096	0.0000
	-1.3000	0.0000	220.0000	49.9248	0.3370	0.0000	0.0000	0.0000
	-2.0000	3.8301	1.0564	8.0000	2.9663	0.0000	0.0000	0.0000
Si	2.1932	4.0000	28.0600	1.8951	0.1737	0.5947	1.2962	4.0000
	11.3429	5.2054	4.0000	21.7115	139.9309	4.2033	5.5558	0.0000
	-1.0000	0.0000	128.2031	9.0751	23.8188	0.8381	0.8563	0.0000
	-4.1684	2.0754	1.0338	4.0000	2.5791	1.4000	0.2000	13.0000
Al	2.1967	3.0000	26.9820	2.3738	0.2328	0.4265	-1.6836	3.0000
	9.4002	3.9009	3.0000	0.0076	16.5151	1.7429	6.8319	0.0000
	-1.0000	0.0000	78.4675	20.0000	0.2500	0.0000	0.8563	0.0000
	-22.7101	1.7045	1.0338	8.0000	2.5791	0.0000	0.0000	0.0000
S	1.9405	2.0000	32.0600	2.0677	0.2099	1.0336	1.5479	6.0000
	9.9575	4.9055	4.0000	52.9998	112.1416	5.8284	8.2545	2.0000
	1.4601	9.7177	71.1843	5.7487	23.2859	12.7147	0.9745	0.0000
	-11.0000	2.7466	1.0338	6.2998	2.8793	0.0000	0.0000	0.0000
X	-0.1000	2.0000	1.0080	2.0000	0.0000	1.0000	-0.1000	6.0000
	10.0000	2.5000	4.0000	0.0000	0.0000	8.5000	1.5000	0.0000
	-0.1000	0.0000	-2.3700	8.7410	13.3640	0.6690	0.9745	0.0000
	-11.0000	2.7466	1.0338	2.0000	2.8793	0.0000	0.0000	0.0000
26	! Nr of bonds; Edis1;LPpen;n.u.;pbe1;pbo5;13corr;pbo6 pbe2;pbo3;pbo4;n.u.;pbo1;pbo2;ovcorr							
1	1	158.2004	99.1897	78.0000	-0.7738	-0.4550	1.0000	37.6117
		0.4590	-0.1000	9.1628	1.0000	-0.0777	6.7268	1.0000
1	2	169.4760	0.0000	0.0000	-0.6083	0.0000	1.0000	6.0000
		5.2290	1.0000	0.0000	1.0000	-0.0500	6.9136	0.0000
2	2	153.3934	0.0000	0.0000	-0.4600	0.0000	1.0000	6.0000
		6.2500	1.0000	0.0000	1.0000	-0.0790	6.0552	0.0000
1	3	158.6946	107.4583	23.3136	-0.4240	-0.1743	1.0000	10.8209
		0.5322	-0.3113	7.0000	1.0000	-0.1447	5.2450	0.0000
3	3	142.2858	145.0000	50.8293	0.2506	-0.1000	1.0000	29.7503
		0.3451	-0.1055	9.0000	1.0000	-0.1225	5.5000	1.0000
2	3	160.0000	0.0000	0.0000	-0.5725	0.0000	1.0000	6.0000
		1.1150	1.0000	0.0000	1.0000	-0.0920	4.2790	0.0000
2	4	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0203	-0.1418	1.0000	13.1260
		8.2136	-0.1310	0.0000	1.0000	-0.2692	6.4254	0.0000
3	4	49.2298	0.0000	43.3991	0.9186	-0.3000	1.0000	36.0000
		0.8319	-0.2500	12.0000	1.0000	-0.0569	9.1331	1.0000
4	4	39.2866	0.0000	0.0000	-0.2437	-0.2000	0.0000	16.0000
		0.1112	-0.2000	10.0000	1.0000	-0.0806	4.1233	0.0000
2	5	250.0000	0.0000	0.0000	-0.7128	0.0000	1.0000	6.0000
		18.5790	1.0000	0.0000	1.0000	-0.0731	7.4983	0.0000
3	5	274.8339	5.0000	0.0000	-0.5884	-0.3000	1.0000	36.0000
		9.9772	-0.2572	28.8153	1.0000	-0.1130	8.4790	6.0658
4	5	0.0000	0.0000	0.0000	0.5000	-0.3000	1.0000	16.0000
		0.5000	-0.2500	15.0000	1.0000	-0.1000	9.0000	0.0000
5	5	70.9120	54.0531	30.0000	0.4931	-0.3000	1.0000	16.0000
		0.2476	-0.8055	7.1248	1.0000	-0.1009	8.7229	0.0000
1	6	0.0000	0.0000	0.0000	-0.6528	-0.3000	0.0000	36.0000
		10.0663	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.1000	10.0000	0.0000
2	6	92.8579	0.0000	0.0000	-0.6528	-0.3000	0.0000	36.0000
		10.0663	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.3842	13.1758	0.0000
3	6	227.9327	0.0000	0.0000	-0.8375	-0.3000	0.0000	36.0000
		0.3686	-0.3500	25.0000	1.0000	-0.1740	5.2057	0.0000
4	6	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.3000	0.0000	26.0000
		0.5000	0.0000	12.0000	1.0000	-0.2000	10.0000	0.0000
5	6	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.3000	0.0000	26.0000
		0.5000	0.0000	12.0000	1.0000	-0.2000	10.0000	0.0000
6	6	34.0777	0.0000	0.0000	0.4832	-0.3000	0.0000	16.0000

			6.4631	-0.4197	14.3085	1.0000	-0.1463	6.1608	0.0000	0.0000
1	7	128.7959	56.4134	39.0716	0.0688	-0.4463	1.0000	31.1766	0.4530	
		0.1955	-0.3587	6.2148	1.0000	-0.0770	6.6386	1.0000	0.0000	
2	7	136.1049	0.0000	0.0000	-0.4669	0.0000	1.0000	6.0000	0.3803	
		10.5730	1.0000	0.0000	1.0000	-0.1000	7.0000	1.0000	0.0000	
3	7	161.0562	220.0000	40.0000	0.6070	-0.2406	1.0000	22.1005	0.2476	
		0.7150	-0.2741	8.3216	1.0000	-0.1109	5.4501	1.0000	0.0000	
4	7	0.0000	0.0000	0.0000	0.5000	-0.5000	1.0000	50.0000	0.6000	
		0.5000	-0.2500	10.0000	1.0000	-0.2000	10.0000	1.0000	0.0000	
5	7	0.0000	0.0000	0.0000	0.5000	-0.5000	1.0000	50.0000	0.6000	
		0.5000	-0.2500	10.0000	1.0000	-0.2000	10.0000	1.0000	0.0000	
6	7	0.0000	0.0000	0.0000	0.5000	-0.5000	1.0000	50.0000	0.6000	
		0.5000	-0.2500	10.0000	1.0000	-0.2000	10.0000	1.0000	0.0000	
7	7	96.1871	93.7006	68.6860	0.0955	-0.4781	1.0000	17.8574	0.6000	
		0.2723	-0.2373	9.7875	1.0000	-0.0950	6.4757	1.0000	0.0000	
15	! Nr of off-diagonal terms; Ediss;Ro;gamma;rsigma;rpi;rpi2									
1	2	0.1239	1.4004	9.8467	1.1210	-1.0000	-1.0000			
2	3	0.0283	1.2885	10.9190	0.9215	-1.0000	-1.0000			
1	3	0.1156	1.8520	9.8317	1.2854	1.1352	1.0706			
2	4	0.0100	1.6000	13.2979	-1.0000	-1.0000	-1.0000			
3	4	0.1054	1.7539	12.0932	1.8770	-1.0000	-1.0000			
2	5	0.2000	1.5207	12.9535	1.2125	-1.0000	-1.0000			
3	5	0.1836	1.9157	10.9070	1.7073	1.2375	-1.0000			
4	5	0.1000	1.9000	11.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000			
1	6	0.2000	1.9000	12.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000			
2	6	0.0564	1.4937	12.0744	1.7276	-1.0000	-1.0000			
3	6	0.1745	1.8928	11.2476	1.5382	-1.0000	-1.0000			
5	6	0.0295	1.5025	11.8687	-1.0000	-1.0000	-1.0000			
1	7	0.1408	1.8161	9.9393	1.7986	1.3021	1.4031			
2	7	0.0895	1.6239	10.0104	1.4640	-1.0000	-1.0000			
3	7	0.2047	1.7931	10.2391	1.4608	1.3987	-1.0000			
61	! Nr of angles;at1;at2;at3;Thetao,o;ka;kb;pv1;pv2									
1	1	1	59.0573	30.7029	0.7606	0.0000	0.7180	6.2933	1.1244	
1	1	2	65.7758	14.5234	6.2481	0.0000	0.5665	0.0000	1.6255	
2	1	2	70.2607	25.2202	3.7312	0.0000	0.0050	0.0000	2.7500	
1	2	2	0.0000	0.0000	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
1	2	1	0.0000	3.4110	7.7350	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
2	2	2	0.0000	27.9213	5.8635	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400	
1	1	3	49.6811	7.1713	4.3889	0.0000	0.7171	10.2661	1.0463	
3	1	3	77.7473	40.1718	2.9802	-25.3063	1.6170	-46.1315	2.2503	
2	1	3	65.0000	13.8815	5.0583	0.0000	0.4985	0.0000	1.4900	
1	3	1	73.5312	44.7275	0.7354	0.0000	3.0000	0.0000	1.0684	
1	3	3	79.4761	36.3701	1.8943	0.0000	0.7351	67.6777	3.0000	
3	3	3	80.7324	30.4554	0.9953	0.0000	1.6310	50.0000	1.0783	
1	3	2	70.1880	20.9562	0.3864	0.0000	0.0050	0.0000	1.6924	
2	3	3	75.6935	50.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.1680	
2	3	2	85.8000	9.8453	2.2720	0.0000	2.8635	0.0000	1.5800	
1	2	3	0.0000	25.0000	3.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0400	
3	2	3	0.0000	15.0000	2.8900	0.0000	0.0000	0.0000	2.8774	
2	2	3	0.0000	8.5744	3.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0421	
3	4	3	1.1001	4.9610	2.2118	0.0000	0.7118	0.0000	1.2337	
4	3	4	2.8736	5.1092	1.8311	0.0000	1.5359	0.0000	1.8829	
2	3	4	42.2769	2.8497	0.2663	0.0000	0.4192	0.0000	1.0000	
3	3	4	70.0000	25.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500	
5	5	5	78.5339	36.4328	1.0067	0.0000	0.1694	0.0000	1.6608	
2	5	5	77.2616	5.0190	7.8944	0.0000	4.0000	0.0000	1.0400	
2	5	2	75.7983	14.4132	2.8640	0.0000	4.0000	0.0000	1.0400	
3	5	5	86.3294	18.3879	5.8529	0.0000	1.7361	0.0000	1.2310	

2	5	3	73.6998	40.0000	1.8782	0.0000	4.0000	0.0000	1.1290	
3	5	3	79.5581	34.9140	1.0801	0.0000	0.1632	0.0000	2.2206	
5	3	5	82.3364	4.7350	1.3544	0.0000	1.4627	0.0000	1.0400	
2	3	5	90.0000	6.6857	1.6689	0.0000	2.5771	0.0000	1.0400	
3	3	5	92.1207	24.3937	0.5000	0.0000	1.7208	0.0000	3.0000	
2	2	5	0.0000	47.1300	6.0000	0.0000	1.6371	0.0000	1.0400	
5	2	5	0.0000	27.4206	6.0000	0.0000	1.6371	0.0000	1.0400	
3	2	5	0.0000	5.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500	
3	2	6	0.0000	4.2750	1.0250	0.0000	1.3750	0.0000	1.4750	
2	2	6	0.0000	3.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2500	
6	2	6	0.0000	20.2391	0.1328	0.0000	2.9860	0.0000	1.0870	
2	3	6	90.0000	19.7491	1.8227	0.0000	1.0000	0.0000	2.5337	
3	3	6	34.4326	25.9544	5.1239	0.0000	2.7500	0.0000	1.7141	
6	3	6	23.7270	19.5973	4.0000	0.0000	0.6619	0.0000	1.9380	
2	6	2	67.4229	4.5148	5.9702	0.0000	3.0000	0.0000	2.6879	
2	6	3	41.8108	17.3800	2.6618	0.0000	0.7372	0.0000	1.0100	
3	6	3	54.0864	9.7594	1.9476	0.0000	3.0000	0.0000	1.4400	
2	6	6	78.2279	37.6504	0.4809	0.0000	1.0000	0.0000	2.9475	
5	3	6	15.7093	0.0100	2.7033	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	
3	5	6	88.2703	0.3954	0.2500	0.0000	0.5000	0.0000	2.1060	
3	6	5	83.8306	0.3712	0.2500	0.0000	0.5000	0.0000	2.1153	
1	1	7	74.4180	33.4273	1.7018	0.1463	0.5000	0.0000	1.6178	
1	7	1	79.7037	28.2036	1.7073	0.1463	0.5000	0.0000	1.6453	
2	1	7	63.3289	29.4225	2.1326	0.0000	0.5000	0.0000	3.0000	
1	7	2	85.9449	38.3109	1.2492	0.0000	0.5000	0.0000	1.1000	
1	7	7	85.6645	40.0000	2.9274	0.1463	0.5000	0.0000	1.3830	
2	7	2	83.8555	5.1317	0.4377	0.0000	0.5000	0.0000	3.0000	
2	7	7	97.0064	32.1121	2.0242	0.0000	0.5000	0.0000	2.8568	
3	7	3	81.7931	31.2043	6.5492	-4.4116	2.6067	0.0000	3.0000	
1	7	3	70.0000	35.0000	3.4223	0.0000	1.3550	0.0000	1.2002	
1	3	7	57.3353	41.0012	1.0609	0.0000	1.3000	0.0000	3.0000	
3	3	7	83.9753	31.0715	3.5590	0.0000	0.8161	0.0000	1.1776	
2	3	7	90.0000	17.5000	3.5000	0.0000	2.0000	0.0000	2.2501	
4	3	6	74.9672	11.7556	5.0000	0.0000	0.3509	0.0000	2.0116	
4	3	7	114.2370	19.7117	0.5240	0.0000	3.0000	0.0000	0.8335	
28	! Nr of torsions;at1;at2;at3;at4;;V1;V2;V3;V2(B0);vconj;n,u;n									
1	1	1	1	-0.2500	34.7453	0.0288	-6.3507	-1.6000	0.0000	0.0000
1	1	1	2	-0.2500	29.2131	0.2945	-4.9581	-2.1802	0.0000	0.0000
2	1	1	2	-0.2500	31.2081	0.4539	-4.8923	-2.2677	0.0000	0.0000
1	1	1	3	-0.3495	22.2142	-0.2959	-2.5000	-1.9066	0.0000	0.0000
2	1	1	3</							

0	2	2	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	3	0	0.0000	0.1000	0.0200	-2.5415	0.0000	0.0000	0.0000
0	1	1	0	0.0000	50.0000	0.3000	-4.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
0	3	3	0	0.5511	25.4150	1.1330	-5.1903	-1.0000	0.0000	0.0000
2	3	7	3	2.5000	2.5000	0.2237	-10.0000	-1.0000	0.0000	0.0000
0	3	7	0	0.1000	50.0000	0.0100	-10.0000	0.0000	0.0000	0.0000
4	! Nr of hydrogen bonds;at1;at2;at3;Rhb;Dehb;vhb1									
3	2	3		2.1200	-3.5800	1.4500	19.5000			
3	2	7		1.5000	-2.0000	3.0582	19.1627			
7	2	3		1.5000	-2.0000	3.0582	19.1627			
7	2	7		1.5000	-2.0000	3.0582	19.1627			